

Эволюционный алгоритм USPEX включает локальную оптимизацию и рассматривает структурные переменные, как физические числа, вместо не интуитивного двоичного кода. Другие важные соображения заключаются в следующем:

Алгоритм отбирает структуры (потомства), которые имеют сходство с более успешными из ранее отобранных структур, что осуществляется путем выбора низкоэнергетических структур, которые станут родителями нового поколения. Действуя на низкоэнергетические структуры, операторы вариации с высокой вероятностью приводят к появлению других низкоэнергетических структур. В методе USPEX используются четыре вариационных оператора:

1) наследственность; 2) решеточная мутация; 3) перестановка; 4) специальные координатные мутации

В своей работе я искал новые стабильные монокристаллические аллотропные формы углерода, механически действуя на углерод, т.е. задавая критические условия изменяя Р и Т. И в этих критических условиях проводилась оптимизация кристалла по энергии и по твердости. Были получены две стабильные кристаллические углеродные структуры. Предсказание кристаллических структур было проведено двумя разными способами: в первом расчете было проведено прогнозирование кристаллической структуры, используя комбинацию USPEX с кодом LAMMPS. В этом простом расчете в одной элементарной ячейке взял 8 атомов углерода и потенциал Терсоффа.

Второй прогноз кристаллической структуры углерода проводился с 8 атомами на элементарную ячейку при 10 ГПа с использованием кода CASTEP, основанный на DFT.

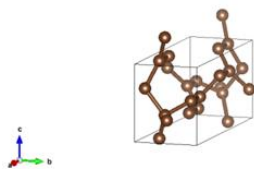


рис. 1. Лучшая структура полученная методом LAMMPS.

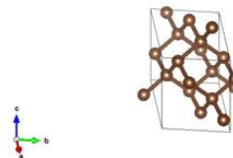


рис. 2. Лучшая структура полученная методом DFT

По полученным двум стабильным структурам, можно сделать заключение, что полученные структуры не похожи на кристаллическую структуру алмаза, что и не удивительно, так как приложенное давление и заданная температура недостаточны для получения алмазоподобной структуры. Но сравнивая две полученные структуры, можно увидеть что расчет вторым методом больше похож по структуре на алмаз. И можно сделать предположение, что можно получить алмазоподобную структуру при помощи второго метода, если увеличить давление и температуру. Поэтому в дальнейшем для получения алмазоподобной кристаллической решетки и подбора оптимальных параметров будем проводить моделирование с увеличением давления и температуры с использованием кода CASTEP, основанного на DFT.

Список публикаций:

- [1] Оганов А. Р., *Совр. методы прогнозирования кристаллической структуры* А. Р. Оганов/ Wiley-VCH, 2010. – 274 с.
- [2] Оганов А. Р., *Прогнозирование кристаллической структуры с использованием ab initio эволюционной техники: принципы и приложения* /Журнал«Химическая физика» [Текст]/А.Р.Оганов,С. В.Гласс. 2006. Том. 124.№ 24.Тема 47. Док. 04
- [3] Оганов А. Р., *Как работает эволюционное прогнозирование кристаллической структуры - и почему* / Отчеты о химических исследованиях [Текст]/ А. Р. Оганов, А. О. Ляхов, М. Валле. 2011. Том. 44. № 3. С. 227—237.

Исследование микроструктуры и прочности сварного соединения Ni-Ni, полученного ультразвуковой сваркой

Шаяхметова Эльвина Рафитовна

Самигуллина Асия Айратовна, Жияев Александр Петрович, Назаров Айрат Ахметович
Уфимский государственный авиационный технический университет

Жияев Александр Петрович
elvina1408@yandex.ru

Ультразвуковая сварка (УЗС) является одним из эффективных методов соединения металлов. Этот вид сварки основан на использовании энергии механических колебаний, генерируемых в материалах с помощью сварочного инструмента колебательной системы, который выполняет возвратно-поступательные движения с ультразвуковой частотой (19-25 Гц) [1,2]. Высокочастотные колебания, возбуждаемые в соединяемых листовых материалах под статическим давлением, вызывают трение их поверхностей друг о друга, пластическую деформацию материалов и нагрев в области сварки. Температура во время сварки ниже, чем температура плавления металла, поэтому УЗС – это метод твердофазного соединения. Образование соединения при УЗС

объясняется рядом процессов, которые происходят под воздействием ультразвука, как-то разрушение окисного слоя, активация поверхности металла, пластическая деформация, диффузия и рекристаллизация [2,3].

УЗС лежит в основе недавно изобретенной ультразвуковой консолидации (последовательного соединения листов металлов), которая является одним из перспективных направлений развития аддитивных технологий [4,5]. УЗС металлов имеет ряд преимуществ по сравнению с другими видами сварки. Во-первых, она позволяет соединять разнородные материалы. Во-вторых, проведение УЗС не требует особой подготовки свариваемых поверхностей и использования вакуума. В-третьих, при УЗС сварное соединение образуется за очень короткое время - 1-2 секунды, при этом статическая нагрузка относительно мала.

Изменения микроструктуры материалов при УЗС, прочность соединений, полученных этим методом, исследованы на примере сварки ряда сплавов алюминия, алюминия и меди, алюминия и титана [6]. Однако в литературе, за исключением работы [7], отсутствуют данные о соединении никеля методом УЗС.

В настоящей работе были исследованы образцы, полученные путем УЗС промышленных листов технически чистого никеля марки НП2 толщиной 0,5 мм. Исследованы образцы двух видов: образцы для испытаний на срез, полученные соединением двух листов под статической нагрузкой от 3,5 до 7 кН, и образцы для исследования структуры, полученные последовательной сваркой (консолидацией) четырех листов под статической нагрузкой 4,5 и 6,0 кН. Время сварки составляло $t = 1$ с.

По результатам испытаний на срез на кривых напряжение-удлинение (перемещение траверсы) видно, что образец разрушается неравномерно: сначала наблюдается отсоединение отдельных небольших участков шва, что на графике имеет вид ступенек, и далее происходит окончательный разрыв. Это свидетельствует о хорошем качестве сварного шва. Наиболее высокие значения прочности достигаются при статических нагрузках от 4,5 кН до 6 кН. Прочность соединений, полученных УЗС при статической нагрузке в 3,5 кН и 7 кН, заметно ниже. Таким образом, оптимальная статическая нагрузка в процессе УЗС для получения сварного соединения двух листов никеля толщиной по 0,5 мм составила 4,5–6,0 кН, при значении времени сварки 1 с. При этом прочность на срез составила величину около 70 МПа, что значительно превышает прочность, полученную в работе [7] (20 МПа).

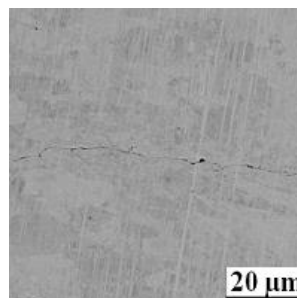
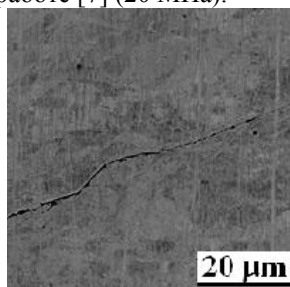


рис.1. Микроструктура консолидированного образца в поперечном сечении, параллельном направлению ультразвуковых колебаний (РЭМ): а) листы толщиной 0,5 мм сварены при нагрузке 4,5 кН; б) листы толщиной 0,5 мм сварены при нагрузке 6,0 кН

Исследование микроструктуры консолидированных образцов показало, что в области сварного соединения в результате УЗС образуется тонкая ультрамелкозернистая (УМЗ) прослойка, толщина которой зависит от статической нагрузки во время УЗС. Участки вдали от сварных соединений имеют крупнозернистую структуру, однако в них наблюдаются следы дислокационной активности.

На КАМ картах, полученных EBSD анализом, видно, что в листах при нагрузке 4,5 кН высокая плотность дислокаций наблюдается во всем образце, что свидетельствует о большой дислокационной активности внутри слоев. При этом значительной деформации в самих листах не наблюдается: размеры и распределение зерен в них такое же, как в исходном состоянии. А в образце, сваренном при нагрузке 6,0 кН, наблюдается деформация вдали от сварных соединений: видно, что мелкие зерна появляются и в объеме слоев, прослойка УМЗ структуры становится шире. Следы дислокационной активности и развития субструктуры видны на КАМ-карте.

Показано, что для образца, полученного сваркой листов толщиной 0,5 мм при нагрузке 4,5 кН и 6,0 кН, микротвердость в швах выше, чем в объеме слоев. По-видимому, это связано с тем, что наблюдается лучшее качество соединений, представляющих из себя узкую УМЗ прослойку. В состоянии поставки микротвердость листов толщиной 0,5 мм составляет 1900 ± 42 МПа, после УЗС – 2300-2600 МПа.

Список публикаций:

- [1] Мицкевич А.М. Ультразвуковая сварка металлов. - В кн.: Физики и техника мощного ультразвука. Т. III. Физические основы ультразвуковой технологии. М., Наука, 1970. С. 71-164.
- [2] Graff K. Ultrasonic metal welding. – In: New Developments in Advanced Welding, N. Ahmed, Editor. 2005, Woodhead: Cambridge. p. 241-269.
- [3] Fujii H.T., Sriraman M.R., Babu S.S. Quantitative Evaluation Of Bulk And Interface Microstructures in Al-3003 alloy builds made by very high power ultrasonic additive manufacturing. Metall. Mater. Trans. A. 2011. 42. 4045-4055.

- [4] White, D. Ultrasonic object consolidation. US Patent 6519500, 23 March 2000.
 [5]. Friel R.J., Harris R.A. Ultrasonic Additive manufacturing – a hybrid production process for novel functional products. *Procedia CIRP*. 2013. V.6. P. 35–40.
 [6] Kumar S., Wu C.S., Padhy G.K., Ding W. Application of ultrasonic vibrations in welding and metal processing: A status review. *J. Manuf. Proc.* 2017. V. 26. P. 295-322.
 [7] Park D.S., Kim J.Y., Seo J.S. Ultrasonic welding of Ni thin sheet. *Int. J. Mining, Metall. Mech. Eng.* 2013. V. 1. P. 168-172.

Структурные свойства соединений меди полученных с помощью УЗС

Юсупова Нелли Рафисовна^{1,2}

Назаров Айрат Ахметович^{1, 2}, Пархимович Николай Юрьевич²

¹Баширский государственный университет

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН

Назаров Айрат Ахметович, д.ф.-м.н.

yusupovanelli1@gmail.com

Ультразвуковая сварка (УЗС) - это метод твердотельного соединения, основанный на приложении ультразвуковых колебаний к листовым материалам при нормальной статической нагрузке, при котором материалы скрепляются нормальным усилием, в то время как применяется высокочастотная вибрация сдвига. Во время этого процесса вибрация деформируется, сдвигается и выравнивает поверхностные неровности, рассеивает внутренние оксиды и загрязняющие вещества и увеличивает площадь контакта свариваемых деталей [1]. Первая демонстрация ультразвуковой сварки была в начале 1950-х годов и была ограничена измельчением зерна и пайкой [2], но теперь метод может применяться к различным более мягким металлам, таким как медь и алюминий, а также к более твердым металлам [3]. Кроме того, ультразвуковая сварка не требует какого-либо припоя или наполнителя и, следовательно, имеет некоторые экологические и экономические преимущества [4].

Технология получила широкое распространение в следующих областях: приборостроение, электроника, производство пластиковых оболочек, выпуск пластмассовых изделий. Он успешно применяется в технологии соединения разных материалов, в том числе металлов [5]. Как правило, ультразвуковая сварка используется для сварки образцов, таких как тонкие проволоки и фольга. Однако из-за наличия мощного оборудования УЗС этот метод в настоящее время становится перспективным для аддитивных технологий производства, особенно для ультразвукового уплотнения больших металлических пластин и фольги в детали [6].

Этот способ сварки характеризуется весьма ценными технологическими свойствами: возможностью соединения металлов без снятия поверхностных пленок и расплавления, особенно хорошей свариваемостью чистой меди, как правило, УЗС используется для сварки образцов, таких как тонкие проволоки и фольга.

В данной работе проведены исследования «объемных» образцов. Для исследования ультразвуковой консолидации была технически чистой меди М1, полученных путем ультразвуковой консолидации листов толщиной 0.7 мм с крупнозернистой структурой. Консолидацию проводили путем последовательной УЗС пяти пластин. На наковальне размещали первые две пластины, сваривали ультразвуком под заданной статической нагрузкой $P = 7$ кН и временем сварки 1 секунда, затем размещали следующую пластину поверх сваренных и повторяли процесс. Поверхность сварочного наконечника волновода имела вид прямоугольника размерами 6х7 мм и параллельно сделанные насечки для лучшего контакта со свариваемыми пластинами. Консолидированные образцы подвергали отжигу в течение 1 часа при температурах 150 °С и 450 °С.

Изучили качество сварных соединений в консолидированных образцах было исследовано с помощью растровой электронной микроскопии, в том числе методом EBSD.

В данной работе получили такие закономерности как распределение макро и микроструктуры от свариваемого слоя. Исследовано качество сварных соединений: наблюдаются несплошности в виде тонких трещин.

Список публикаций:

- [1] Graff K, Bloss M (2008) *Understanding ultrasonic welding*;
 [2] Ahmed N (2005) *New developments in advanced welding*. Woodhead publishing 298;
 [3] Bloss M, Graff K (2009) *Ultrasonic Metal Welding of Advanced Alloys: The Weld ability of Stainless Steel Titanium and Nickel-Based Super alloys*. In *Trends in Welding Research, Proceedings of the 8th International conference*. ASM International;
 [4] Kim S, Jang H, Kim E, Park D (2010) *Vibration Analysis of Ultrasonic Metal Welding Horn for Optimal Design*. *Proc Int Conf Mechanical Industrial and Manufacturing Technologies (MIMT)*. Sanya China 23.;
 [5] 2015 *Power Ultrasonics. Applications of High-Intensity Ultrasound* ed J A Gallego-Juarez and K F Graff (Cambridge: Woodhead Publishing)];
 [6] 2015 *Power Ultrasonics. Applications of High-Intensity Ultrasound* ed J A Gallego-Juarez and K F Graff (Cambridge: Woodhead Publishing)- [2] White D 2000 *Ultrasonic object consolidation US patent # 6,519,500* 3 Friel R J and Harris R A 2013 *Procedia CIRP* 6 35].